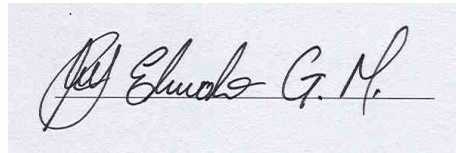


**EXCITONES EN DISCOS CUÁNTICOS EMBEBIDOS EN  
HILOS CUÁNTICOS**

**JESÚS EDUARDO GALVÁN MOYA**

A rectangular box containing a handwritten signature in black ink. The signature is written in a cursive style and appears to read 'Jesús Eduardo G. Moya'.

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER  
FACULTAD DE CIENCIAS  
ESCUELA DE FÍSICA  
BUCARAMANGA**

**2006**

# EXCITONES EN DISCOS CUÁNTICOS EMBEBIDOS EN HILOS CUÁNTICOS

Trabajo de Grado como requisito para optar al título de Físico

JESÚS EDUARDO GALVÁN MOYA

Director

Dr. HAROLD PAREDES GUTIÉRREZ

Codirector

Dr. CARLOS LEONARDO BELTRÁN RÍOS



UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER

FACULTAD DE CIENCIAS

ESCUELA DE FÍSICA

BUCARAMANGA

2006

*A los gestores de todos mis triunfos:*

*A la mujer que con todo su apoyo, amistad incondicional y ayuda irrestricta siempre me respaldó con el amor mas grande que jamas alguien tendrá, mi madre Ubaldina Moya Vélez, al hombre que impulso mis sueños, mi héroe desde pequeño y quien sacrifico sus mejores años y oportunidades por toda la familia, mi padre Pablo Eduardo Galván García. Su amor nunca dejó incentivar todo mi trabajo.*

*A mis dos pequeños motorcitos, mis hermanos Alexander Eliecer y Leonorana Stefany, su preocupación y estimulo me daba cada vez mas fuerza para no flaquear en los momentos mas difíciles, sus palabras siempre fueron las mejores, los amo.*

*A la parte de mi familia que siempre me apoyó.*

*Por ultimo, también quiero dedicar este trabajo a los hijos que tendré mas adelante, son ustedes la luz al final del camino y por ustedes siempre haré mi mejor esfuerzo.*

*Desde el fondo de mi corazón, muchisimas Gracias.*

# AGRADECIMIENTOS

---

Quiero expresar mis mas sinceros agradecimientos:

A los Doctores Harold Paredes Gutiérrez y Carlos Leonardo Beltrán Ríos, por aceptar ser mis orientadores en la tesis, por toda su colaboración y su amistad.

A los profesores M.Sc. Jairo H. Marín por hacer tan amenos todos los dias y por su gran amistad, Dr. Francisco J. Betancur por sus oportunos consejos y su disponibilidad en los momentos mas necesarios y M.Sc. Francisco Garcia R. por su amistad y continua colaboración.

A mis compañeros de “tinta” *Hamilton Carrillo* por la amistad tan grande que me ha regalado y que nunca voy a olvidar, por su confianza, su ayuda y su respaldo durante la carrera, *Carlos Gómez (Cuervo)* por su gran amistad y por que solo él sabe todo lo que sufrimos durante el desarrollo de este trabajo, *Fredy Rodriguez* por su amistad y por estar siempre ahí aunque no me gustara mucho la bulla a la que el llamaba música, *Oscar Acevedo* porque generalmente era el punto de partida para solucionar casi cualquier problema. A todos por soportarme tanto tiempo, aunque yo también tuve que soportarlos.

A mis compañeros Ficomacos y ex-Ficomacos, John Lozada, William Amado, William

Gutiérrez, Juan Carlos Piña y Victor Basto, por su amistad y ayuda.

Muy especialmente al Dr. Ilia Davidovich Mikhailov, quien incansablemente aun viendo mis dificultades de aprendizaje, dedicó importante parte de su tiempo para enseñarme a corregir mis errores, por esto, por su gran paciencia, su prudencia y total disponibilidad en los momentos mas críticos del desarrollo de este trabajo, muchas gracias “profe”.

Y por ultimo aunque el mas importante, al único que en todos los momentos, fáciles y difíciles, a pesar de mi negligencia y obstinación siempre ha guiado todos mis pasos, a quien me permitió todos estos momentos y el conocer a toda esta gente tan linda que nunca se borrará de mi mente, a quien me prestó la vida y me ayudó a llegar a donde hoy en día estoy, gracias DIOS por todo eso y por todas las demás cosas que jamás podré entender ni explicar.

---

**TÍTULO :** EXCITONES EN DISCOS CUÁNTICOS EMBEBIDOS EN HILOS CUÁNTICOS \*.

**AUTORES :** GALVÁN MOYA, Jesús Eduardo †.

**PALABRAS CLAVES :** Excitón, Heteroestructuras semiconductoras, disco cuántico, Energía de enlace.

**DESCRIPCIÓN :** En este trabajo se calculó y analizó la energía de enlace del estado base de un excitón en un disco embebido en un hilo cuántico cilíndrico, así como su dependencia de las dimensiones y el confinamiento de la heteroestructura, haciendo uso del método de dimensión fractal. Con el fin de mostrar la confiabilidad del método se comparan los resultados obtenidos para casos límites de QW y QWW con trabajos anteriores en sistemas similares.

Como un aporte significativo, en este trabajo se simplificó una integral séxtuple requerida para el cálculo del Jacobiano del sistema a una integral triple, utilizando un método de sustituciones sencillas para eliminar las singularidades de la integral inicial. Hasta el momento este tipo de integrales se ha encontrado en diversos cálculos variacionales pero no se reporta una solución en la cual se eliminaran las singularidades de la integral original.

---

\*Trabajo de Grado

†Facultad de Ciencias, Escuela de Física, Harold Paredes G. y Carlos L. Beltrán R. (Directores)

**TITLE :** EXCITONS IN QUANTUM DISKS EMBEDDED IN QUANTUM WIRES\*.

**AUTHORS :** GALVÁN MOYA, Jesús Eduardo †.

**KEY WORDS :** Exciton, Semiconductors heterostructures, Quantum disk, Binding energy.

**DESCRIPTION :** The ground state binding energy for exciton confined in a quantum disk embedded in a cylindrical quantum wires is calculated, such as its dependence of the dimensions and the confinement of the heterostructure using the fractal dimension method. With the aim to show the efficient of the method, our results for limit cases QW and QWW are compared with results of previous works in similar systems.

As important contribution in this work we simplified a sextuple integral to another triple integral for the solution of the Jacobian's system, using a simple substitution method for eliminated the singularities in the first integral. Until this moment these type of integrals were found in several variational producers but there is no record about a solutions in which singularities were removed.

---

\*Senior Project Tesis

†Facultad de Ciencias, Escuela de Física, Harold Paredes G. y Carlos L. Beltrán R. (Directors)

# ÍNDICE GENERAL

---

<b>INTRODUCCIÓN</b>	<b>1</b>
<b>1. FUNDAMENTOS BÁSICOS</b>	<b>3</b>
1.1. Heteroestructuras . . . . .	3
1.2. Aproximación de Masa Efectiva (AME) . . . . .	5
1.3. Excitones en heteroestructuras . . . . .	5
1.4. Método de Dimensión Fractal (MDF) . . . . .	7
1.5. Método de Barrido Trigonométrico (MBT) . . . . .	9
<b>2. MODELO TEÓRICO</b>	<b>11</b>
2.1. Hamiltoniano del sistema . . . . .	12
2.2. Ecuación de Schrödinger para una partícula libre . . . . .	14
2.2.1. Solución Radial . . . . .	14

---

2.2.2. Solución Axial . . . . .	15
2.3. MDF aplicado a X . . . . .	15
2.4. MBT aplicado a X . . . . .	17
<b>3. CÁLCULOS Y RESULTADOS</b>	<b>19</b>
3.1. Parámetros . . . . .	19
3.2. Energía de enlace del excitón en el sistema . . . . .	20
3.2.1. Confiabilidad del Método (Casos Limites) . . . . .	21
3.2.2. $E_b$ Vs L . . . . .	26
3.2.3. $E_b$ Vs R . . . . .	28
<b>CONCLUSIONES</b>	<b>30</b>
<b>APÉNDICES</b>	<b>32</b>
<b>REFERENCIAS</b>	<b>39</b>

# ÍNDICE DE FIGURAS

---

2.1. <i>Excitón en un disco cuántico embebido en un hilo cuántico . . . . .</i>	12
3.1. <i>Energía de enlace de <math>X_{hh}</math> para el caso limite QW . . . . .</i>	21
3.2. <i>Energía de enlace de <math>X_{lh}</math> para el caso limite QW . . . . .</i>	22
3.3. <i>Energía de enlace de <math>X_{hh}</math> para el caso limite QWW . . . . .</i>	23
3.4. <i>Energía de enlace de <math>X_{hh}</math> para un Disco Cuántico, en este caso <math>L=7nm</math></i>	24
3.5. <i>Energía de enlace de <math>X_{hh}</math> en un disco cuántico para distintos valores de <math>R</math></i>	26
3.6. <i>Energía de enlace de <math>X_{lh}</math> en un disco cuántico para distintos valores de <math>R</math></i>	27
3.7. <i>Energía de enlace de <math>X_{hh}</math> en un disco cuántico para distintos valores de <math>L</math></i>	28
3.8. <i>Energía de enlace de <math>X_{lh}</math> en un disco cuántico para distintos valores de <math>L</math></i>	29

# ÍNDICE DE TABLAS

---

3.1. <i>Parámetros físicos utilizados en este trabajo</i> . . . . .	20
---	----

# INTRODUCCIÓN

---

En la actualidad las nuevas técnicas para crecer semiconductores con capas alternantes ultradelgadas, han permitido crear materiales con propiedades optoelectrónicas a gusto del consumidor. La progresiva miniaturización de estas estructuras recientemente ha abierto un nuevo campo de investigación conocido como nanotecnología. A raíz de las pequeñas distancias entre las juntas los efectos cuánticos son más notorios, de aquí nace la importancia de estudiar estos efectos y el comportamiento de partículas portadoras de carga dentro ellas.

Gracias al continuo avance de la tecnología, desde los primeras décadas de investigación sobre materiales semiconductores, se han implementado diversas técnicas para crecer heteroestructuras, tales como Deposición Molecular Epitaxial (MBE), Deposición Química Metal-Orgánica de la fase de Vapor (MOCVD) [1], Epitaxia por fase líquida [2], entre otras, a través de las cuales se han podido crecer estructuras con diferentes formas y grados de libertad como pozos (QWs), hilos (QWWs), super-redes (SLs) y puntos cuánticos (QDs).

El estudio experimental de los excitones confinados en estructuras cuánticas comenzó hacia el final de la década de los 70's y comienzos de los 80's. Uno de los primeros artículos teóricos que se publicó sobre la existencia de niveles excitados de excitones en pozos cuánticos (QWs) de *GaAs* fue realizado por Miller [3], quien presentó un modelo teóri-

co que corroboró los resultados experimentales de espectros de absorción de QWs de  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ .

Dentro de la Aproximación de Masa Efectiva (AME) se han desarrollado diversos trabajos teóricos sobre el estudio de excitones en diferentes tipos de heteroestructuras, de la misma forma se han usado diversos métodos y modelos matemáticos para solucionar este tipo de problemas, tales como: el Método de Dimensión Fraccional [4], Método de Monte Carlo [5], Métodos de expansión en series [6] y Método de Dimensión Fractal [7], entre otros.

Una de las primeras heteroestructuras en estudiarse fueron los QWs mediante aproximaciones variacionales [8, 9], Método de Monte Carlo [5], Método de Dimensión Fraccional [4] y en presencia de un campo eléctrico utilizando expansiones por series [6]. Luego del avance de la ciencia y la construcción de QDs, el análisis de éstos ha sido a gran escala, utilizando aproximaciones variacionales [10] y recientemente el Método de Dimensión Fractal [11].

De la misma forma, los QWWs rectangulares han sido ampliamente estudiados a través de aproximaciones variacionales [12, 13, 14]. Igualmente se han estudiado los QWWs cilíndricos mediante la aproximación variacional [15, 16] y el Método de Dimensión Fractal [7]. Recientemente se publicó un artículo interesante sobre la aplicación de estos sistemas, que tiene que ver con los picos de energía asociados a la fotoluminiscencia de excitones en hilos cuánticos autoensamblados (SAQWWs) rectangulares y en forma de V [17], donde se hizo el análisis de la influencia de un campo magnético en dirección paralela y perpendicular al eje del hilo.

En los últimos años el Método de Dimensión Fractal (MDF) se ha implementado en los trabajos de investigación [11, 7], realizados por el grupo de física computacional en materia condensada (FICOMACO) de la Universidad Industrial de Santander (UIS), grupo

en el cual actualmente también se trabaja con el Método de Barrido Trigonométrico (MBT) para cálculos de la energía del estado base de diversos sistemas.

En el 2002, Gudiksen y colaboradores [18] mostraron los primeros resultados del crecimiento de superredes en nanohilos (NWSLs), estas estructuras de superredes son creadas dentro de los nanohilos por la repetida modulación de reactantes semiconductores en fase de vapor durante el crecimiento de los mismos, en la publicación se reporta la construcción de nanohilos de 2 y hasta 21 capas. Posteriormente Ristić y colaboradores. [19] caracterizaron discos cuánticos de  $GaN$  embebidos en nanocolumnas cuánticas de  $Al_xGa_{1-x}N$ , crecidas utilizando el método MBE. En este trabajo se analizaron diversos comportamientos y propiedades físicas de este tipo de estructuras.

Uno de los primeros trabajos teóricos sobre estos nanohilos modulados (MNWs) fue realizado por Voon y Willatzen [20], quienes estudiaron diferentes propiedades y comportamientos de electrones en este tipo de estructuras, encontrando radicales diferencias entre el comportamiento de los electrones en MNWs con respecto a los QWs y QWWs.

Como se puede ver este tipo de estructuras de reciente aparición (MNWs y NWSLs), debido a su potencial utilización en nuevas tecnologías, hace interesante un análisis detallado del comportamiento de diferentes partículas en dichos sistemas. En este trabajo analizaremos una sección muy particular de un NWSL que consiste de un disco cuántico embebido en un nanohilo. Estudiaremos la influencia de sus dimensiones en el comportamiento de la energía de enlace de un excitón, considerando los casos límites de QD, QW, QWW y pasando por sus estados intermedios, utilizando el Método de Dimensión Fractal (MDF).

# FUNDAMENTOS BÁSICOS

---

---

## 1.1 HETEROESTRUCTURAS SEMICONDUCTORAS

En las últimas décadas un gran número de investigaciones han sido desarrolladas, de forma teórica y experimental, en nanoestructuras semiconductoras (o sistemas de baja dimensionalidad) con diferentes características y formas físicas como QWs, QWWs, QDs y SLs, compuestas por más de un material semiconductor. Esta nueva época de la nanotecnología tuvo su comienzo con el trabajo de Esaki y Tsu [21], quienes analizaron las propiedades de una superred fabricada a partir de dos semiconductores bases (A y B) con diferentes anchos de bandas prohibidas crecidos en forma alternadas (ABABA...) y se estudiaron diferentes propiedades de estos tipos de estructuras.

Para crear una heterojuntura semiconductoras con interfaces perfectas, se requiere que los materiales utilizados para formarlas tengan una estructura cristalina similar y parámetros de red muy parecidos, de manera que para cumplir con este objetivo frecuentemente se utilizan los compuestos de los grupos III-V, sustituyendo parcialmente uno de los compuestos por otro átomo del mismo grupo. La diferencia de las bandas prohibidas

produce un salto de potencial en las interfaces y de esta manera se forma un pozo de potencial en el cual se pueden confinar los portadores de carga, tanto en estado libre como ligados.

Un amplio rango de materiales III-V ha sido investigado por sus propiedades semiconductoras, aunque solamente unos pocos son comúnmente usados en heterojunturas. Para aumentar el rango de propiedades y lograr los requerimientos necesarios, se han utilizado aleaciones entre varios compuestos, de las cuales la más usada es la aleación  $Al_xGa_{1-x}As$ , la cual se investiga con gran interés por sus actuales y posibles nuevas aplicaciones tecnológicas.

Las heteroestructuras están formadas por varias juntas y por consiguiente existen innumerables posibilidades y formas para éstas. Su gran utilidad tecnológica hace de estas heteroestructuras un punto fuerte de investigación.

Además, se ha encontrado experimentalmente que existen dos bandas de energías distintas en los semiconductores. La banda mas baja esta casi totalmente llena de electrones, esta banda es originada por los electrones de valencia los cuales constituyen los enlaces covalentes que unen a los átomos en el cristal, por esto es llamada “*banda de valencia*”. La banda superior esta casi desprovista de electrones, esto representa potencialmente estados de electrones excitados, los cuales están ocupados por electrones promovidos desde la banda de valencia, cada electrón excitado en esta banda esta debidamente acelerado por un campo eléctrico aplicado y contribuye al flujo de corriente, esta banda es conocida como “*banda de conducción*”.

## 1.2 APROXIMACIÓN DE MASA EFECTIVA (AME)

Debido a que el potencial de un cristal o una heteroestructura semiconductor es complejo, regularmente es utilizado un método de simplificación, llamado Aproximación de Masa Efectiva (AME), en la cual se asume que la estructura de banda de los semiconductores cristalinos puede ser en gran parte ignorada y que las propiedades físicas de los semiconductores depende sólo de los portadores de carga que se ubican en el extremo de cada banda. Lo que básicamente se hace en esta aproximación es reemplazar la masa real de los portadores de carga por un tensor de masa cuyos elementos son determinados por la estructura de banda no perturbada y de esta forma ignorar el potencial periódico de la red.

Esta aproximación ha resultado ser muy adecuada para electrones con relativamente bajo momento lineal como ocurre en presencia de campos eléctricos débiles, de hecho es la parametrización mas ampliamente usada en la física de semiconductores, además su eficiencia ha sido corroborada experimentalmente en diversas oportunidades.

## 1.3 EXCITONES EN HETEROESTRUCTURAS SEMICONDUCTORAS

El excitón es una cuasi-partícula formada por un electrón que ha abandonado la banda de valencia por absorción de fotones, que inciden sobre la estructura con una energía comparable a la de la brecha de energía prohibida del material que conforma la misma, y ha pasado a la banda de conducción dejando un hueco (que se comporta como una partícula con carga positiva) con el cual interactúa a través del potencial de Coulomb; dicha cuasi-partícula ha mostrado ser responsable de importantes efectos ópticos en

heteroestructuras semiconductoras, ya que su energía de enlace aumenta de una manera bastante significativa cuando se ve confinada a distancias del orden de su radio de Bohr.

En un excitón la masa del hueco es generalmente mucho mayor que la masa del electrón, por tal razón este sistema de dos cuerpos se asemeja a un átomo de hidrógeno, con el electrón de carga negativa orbitando alrededor del hueco con carga positiva. El excitón es una partícula completamente estable y puede tener tiempos de vida relativamente largos, del orden de cientos de picosegundos o nanosegundos [22]. La recombinación del excitón a bajas temperaturas es una característica importante de la fotoluminiscencia, debido a que su energía de enlace es relativamente baja (unos pocos milielectronvoltios (meV)) y tiende a disociarse a altas temperaturas.

Mientras que en un semiconductor en bloque, la energía total del excitón es simplemente la energía del par electrón-hueco libres (es decir la energía de la banda) ( $E_g$ ) menos la energía de enlace del excitón ( $E_b$ ), en una heteroestructura existen aportes adicionales debido a las energías de confinamiento del electrón ( $E_e$ ) y el hueco ( $E_h$ ), es decir:

$$E = E_g - E_b \quad (\text{Bloque}) \quad (1.1a)$$

$$E = E_g + E_e + E_h - E_b \quad (\text{Heteroestructura}) \quad (1.1b)$$

La energía total del excitón es claramente una función de la dependencia estructural de las energías de confinamiento. Además es de esperarse que la energía del potencial coulombiano ( $E_b$ ) también dependa del tipo de heteroestructura, este último efecto es debido a que la separación electrón-hueco puede variar considerablemente entre heteroestructuras, ya que como es fácil imaginar esta separación es mucho mas pequeña en heteroestructuras de gap directo que en las de gap indirecto [24].

## 1.4 MÉTODO DE DIMENSIÓN FRACTAL (MDF)

Este es un método variacional muy refinado, que ha mostrado ser eficiente y de muy buenos resultados [11, 7], es actualmente utilizado por el grupo FICOMACO en sus trabajos de investigación.

En este procedimiento la ecuación de onda para un excitón en una heteroestructura se reduce a una ecuación similar a la de un átomo hidrogenoide en un espacio isotrópico efectivo con dimensión fraccional, la cual se determina a través de la definición de Mandelbrot [25] para objetos fractales.

La función de onda que define el espectro electrónico de un excitón en una estructura (de 1, 2 o 3 dimensiones) dentro de la AME, corresponde a un problema de dos partículas en un campo central. Esta función de onda en coordenadas adecuadas es completamente separable y puede ser hallada a través de una ecuación diferencial para la parte radial (distancia electrón-hueco) de la función de onda, introduciendo, como veremos mas adelante, un Jacobiano del sistema  $J(r)$  cuya dependencia con respecto a dicha distancia esta dada por una ley de potencia  $J(r) \propto r^\alpha$ , donde el parámetro de escalamiento esta relacionado con la dimensión  $D$  del espacio, como  $\alpha = D - 1$ .

La ecuación de Schrödinger para un excitón en cualquier heteroestructura es:

$$H\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}) \quad (1.2)$$

Donde  $H$  es el Hamiltoniano del sistema y  $E$  la energía total. Supondremos una solución variacional para la función de onda, de la forma:

$$\Psi(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = f_{0_e} f_{0_h} \Phi(|\vec{r}_e - \vec{r}_h|) \quad (1.3)$$

siendo  $f_{0_{e,h}}$  las funciones de onda para el electrón (e) y el hueco (h) libres en el sistema (no correlacionados) y  $\Phi(|\vec{r}_e - \vec{r}_h|)$  una función envolvente que introduce la interacción

entre las partículas, es importante notar que esta función solo depende de la distancia de separación electrón-hueco.

La función  $f_0 = f_{0_e} f_{0_h}$  cumple que:

$$H f_0 = E_0 f_0 \quad (1.4)$$

en esta ecuación  $E_0$  es la energía de las partículas libres (no correlacionadas) y  $f_0$  es la función de onda de las partículas del sistema.

Partiendo del principio variacional de Schrödinger, podemos ver que la función envolvente  $\Phi(|\vec{r}_e - \vec{r}_h|)$  debe ser elegida de tal forma que minimice el funcional definido como:

$$F[\Phi] = \langle f_0 \Phi | H - E | f_0 \Phi \rangle \quad (1.5)$$

Luego de una breve manipulación matemática encontramos que:

$$F[\Phi] = \int J(r) \left[ \Phi'^2 + \left( E_0 - E - \frac{2}{r} \right) \Phi^2 \right] dr \quad (1.6)$$

donde  $r$  es la distancia entre las partículas, y  $J(r)$  es el Jacobiano del sistema, que esta definido como:

$$J(r) = \int_{r_e} \int_{r_h} f_0^2 \delta(r - |\vec{r}_e - \vec{r}_h|) d\vec{r}_h d\vec{r}_e \quad (1.7)$$

Por último, al minimizar el funcional de la ecuación (1.6), encontramos:

$$\frac{1}{J(r)} \frac{d}{dr} \left( J(r) \frac{d\Phi(r)}{dr} \right) + \frac{2}{r} \Phi(r) = -E_b \Phi(r) \quad (1.8)$$

Que como podemos ver tiene la misma forma que la ecuación diferencial para el átomo de hidrogeno, con la diferencia que en este caso el Jacobiano del sistema esta dado por una integral, ademas se introduce un nuevo término  $E_b$  conocido como la energia de enlace del estado base del sistema, definido como:

$$E_b = E_0 - E \quad (1.9)$$

Expandiendo la ecuación (1.8) podemos encontrar:

$$\Phi''(r) + \frac{d(\ln[J(r)])}{dr}\Phi'(r) + \left(\frac{2}{r} + E_b\right)\Phi(r) = 0 \quad (1.10)$$

Para solucionar la ecuación (1.10), se utilizará el método de barrido trigonometrico.

## 1.5 MÉTODO DE BARRIDO TRIGONOMÉTRICO (MBT)

Debido a la complejidad del problema, como podemos ver en la ecuación (1.10), es necesario utilizar métodos numéricos para encontrar la solución final de nuestro problema, por este motivo es preciso inducir al lector al manejo del método numérico de aproximación que se utilizará en el presente trabajo.

Dada una ecuación diferencial de la forma:

$$\frac{d^2\chi(r)}{dr^2} + \alpha(r)\frac{d\chi(r)}{dr} + \beta(r)\chi(r) = 0 \quad (1.11)$$

Es necesario hacer un cambio de coordenadas para reducirla a una ecuación diferencial de primer orden, para esto utilizaremos las coordenadas polares de Poincare:

$$\chi(r) = A(r) \cos \theta(r) \quad \chi'(r) = A(r) \sin \theta(r) \quad (1.12)$$

Derivando la primera expresión e igualando el resultado con la segunda expresión de esta ecuación, obtenemos:

$$A'(r) = A(r) \frac{\sin \theta(r)}{\cos \theta(r)} [\theta'(r) + 1] \quad (1.13)$$

Reemplazando las expresiones (1.12) en la ecuación (1.11) y utilizando la relación (1.13), encontramos la siguiente ecuación diferencial para  $\theta(r)$ :

$$\theta'(r) = - [\sin^2 \theta(r) + \alpha(r) \cos^2 \theta(r) + \beta(r) \sin \theta(r) \cos \theta(r)] \quad (1.14)$$

Luego reemplazando la ecuación (1.14) en la ecuación (1.13) e integrando obtenemos la expresión para  $A(r)$ :

$$A(r) = \exp \left\{ \int_0^r [(1 - \alpha(r)) \sin \theta(r) \cos \theta(r) - \beta(r) \sin^2 \theta(r)] dr \right\}; \quad A(0) = 1 \quad (1.15)$$

Como podemos ver, la expresión dada en la ecuación (1.14) es una ecuación diferencial de primer grado que, con condiciones iniciales definidas, se transforma en un problema de Cauchy y como es bien sabido este problema puede solucionarse utilizando diferentes métodos numéricos por ejemplo el método de Rounge-Kutta, el cual será utilizado en este trabajo.

---

## MODELO TEÓRICO

---

Recientemente el avance del estudio teórico de excitones ( $X$ ) en heteroestructuras ha encontrado comprobación experimental en diversos tipos de situaciones [17], es así como una de las más interesantes aplicaciones de estos trabajos consiste en el cálculo de los picos de energía de la fotoluminiscencia debido a la inevitable recombinación del excitón, estos picos se pueden relacionar con la energía del gap (banda de energía prohibida) de la heteroestructura, de esta forma es posible caracterizar el tipo de heteroestructura y sus posibles componentes, y es ahí donde radica la importancia de este estudio.

El sistema que se considera en este trabajo es el de un excitón en un disco cuántico de  $GaAs$  contenido en un hilo cuántico de  $Al_xGa_{1-x}As$ , como se observa en la Figura 1.

El potencial de confinamiento del sistema esta definido como ( $i = e, h$ ):

$$V_i(z_i) = \begin{cases} 0 & |z_i| < \frac{L}{2} \\ V_{0_i} & |z_i| \geq \frac{L}{2} \end{cases} \quad V_i(\rho_i) = \begin{cases} 0 & \rho_i < R \\ \infty & \rho_i \geq R \end{cases} \quad (2.1)$$

El término de la interacción coulombiana entre el electrón y el hueco hace que la función de onda del sistema no sea separable, debido a esto, en el presente trabajo utilizaremos

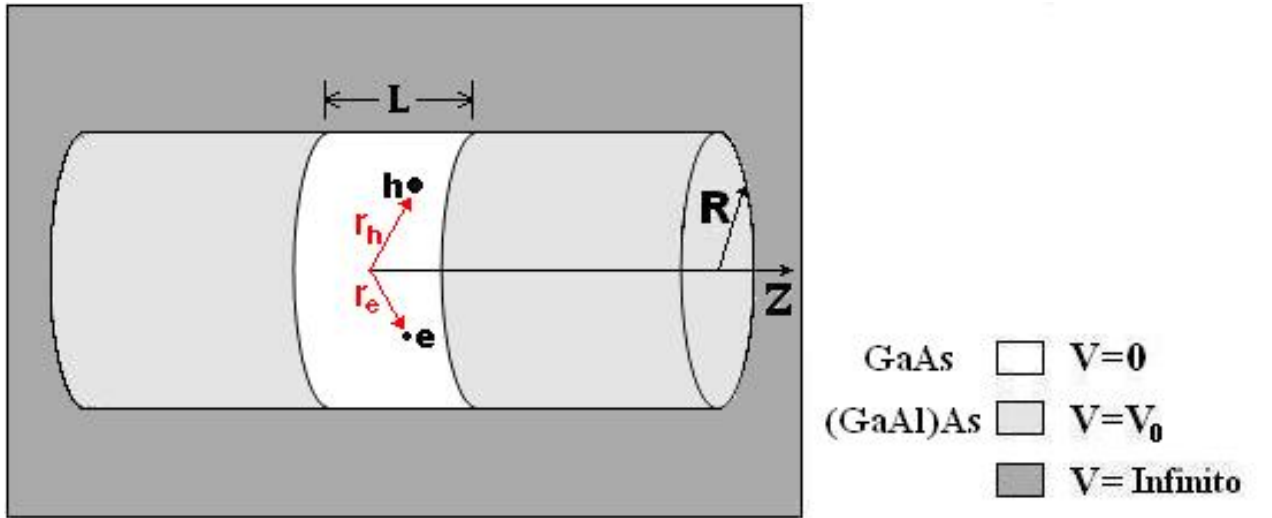


Figura 2.1: *Excitón en un disco cuántico embebido en un hilo cuántico*

una solución variacional para la función de onda del excitón con la ayuda del MDF.

## 2.1 HAMILTONIANO DEL SISTEMA

El Hamiltoniano para el par electrón-hueco en un disco embebido en un hilo cuántico, puede considerarse como la suma de tres términos:

$$H = H_e + H_h + H_{eh} \quad (2.2)$$

donde  $H_e$  y  $H_h$  son el Hamiltoniano del electrón y el hueco libres en el sistema no correlacionados respectivamente, y  $H_{eh}$  es el aporte al hamiltoniano debido a la interacción entre las dos partículas. Utilizando coordenadas cilíndricas por la simetría del sistema y dentro de la AME podemos escribir cada uno de los dos primeros términos

del hamiltoniano anterior como:

$$H_e = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left( \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} + \Delta_e^{(2)} \right) + V_e(\rho_e, z_e, \varphi_e) \quad (2.3)$$

$$H_h = -\frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}} \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} - \frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} \Delta_h^{(2)} + V_h(\rho_h, z_h, \varphi_h)$$

En este caso  $m_e$  es la masa efectiva del electrón,  $m_{\parallel}$  es la masa efectiva del hueco en la dirección de crecimiento  $z$  y  $m_{\perp}$  la masa efectiva del hueco en el plano perpendicular a la dirección de crecimiento.

Para facilitar la manipulación de estos cálculos se buscan los parámetros adecuados para hacer adimensional el Hamiltoniano, es así como definimos el Rydberg efectivo ( $Ry$ ) como nuestra nueva unidad de energía y el Radio de Bohr efectivo ( $a_0$ ) como nuestra nueva unidad de longitud, de la siguiente forma:

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\epsilon\hbar^2}{\mu e^2} \quad Ry = \frac{\hbar^2}{2\mu a_0^2} \quad (2.4)$$

Así que reescribiendo el Hamiltoniano de una forma adimensional, tenemos:

$$H = -\eta_e \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} - \eta_{\parallel} \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} - \eta_e \Delta_e^{(2)} - \eta_{\perp} \Delta_h^{(2)} + V_e(\rho_e, z_e, \varphi_e) + V_h(\rho_h, z_h, \varphi_h) - \frac{2}{r} \quad (2.5)$$

En esta ecuación es fácil diferenciar los Hamiltonianos para cada uno de los portadores de carga, así:

$$H_e = -\eta_e \left( \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} + \Delta_e^{(2)} \right) + V_e(\rho_e, z_e, \varphi_e) \quad (2.6)$$

$$H_h = \eta_{\perp} \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} - \eta_{\parallel} \Delta_h^{(2)} + V_h(\rho_h, z_h, \varphi_h)$$

donde:

$$\eta_e = \frac{\mu_{\pm}}{m_e} \quad \eta_{\perp} = \frac{\mu_{\pm}}{m_{\perp}} \quad \eta_{\parallel} = \frac{\mu_{\pm}}{m_{\parallel}} \quad (2.7)$$

$$\frac{1}{\mu_{\pm}} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_{\parallel\pm}} \quad \Delta_i^{(2)} = \frac{1}{\rho_i} \frac{\partial}{\partial \rho_i} \left( \rho_i \frac{\partial}{\partial \rho_i} \right) - \frac{1}{\rho_i^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi_i^2}$$

Los valores de  $m_{\perp}$  y  $m_{\parallel}$  están dados en terminos de los bien conocidos parametros de banda de Kohn Luttinger  $\gamma_1$  y  $\gamma_2$ , por la expresión.

$$m_{\parallel\pm} = \frac{m_0}{\gamma_1 \pm \gamma_2}$$

$$m_{\perp\pm} = \frac{m_0}{\gamma_1 \mp 2\gamma_2}$$
(2.8)

Los signos +/- indican hueco pesado/ligero respectivamente.

## 2.2 PARTICULAS LIBRES EN EL SISTEMA (NO CORRELACIONADAS)

La ecuación de Schrödinger aplicada a cada partícula  $H_i\Psi_i = E_i\Psi_i$ , debido a la simetría azimutal del sistema, permite escribir la función de onda para el estado base (1s) de la siguiente forma:

$$\Psi_i = R_i(\rho_i)Z(z_i)$$
(2.9)

Así pues, este problema se reduce a encontrar las funciones de onda para cada partícula en las coordenadas  $z$  y  $\rho$ , que están bien definidas debido a la simetría del sistema.

### 2.2.1. Solución Radial

En la coordenada  $\rho$ , como se puede observar en la definición del potencial (2.1), el problema se convierte en resolver un hilo cilíndrico de potencial infinito, por lo que la solución a la función de onda radial esta dada por:

$$R_i(\rho_i) = A_{\rho_i} \begin{cases} J_0(k_{\rho_i}\rho_i) & \rho_i < R \\ 0 & \rho_i > R \end{cases}$$
(2.10)

donde la constante de normalización es:

$$A_{\rho_i} = \sqrt{2} \frac{R}{J_1(k_{\rho_i} R)} \quad (2.11)$$

### 2.2.2. Solución Axial

En la coordenada  $z$ , la situación es distinta debido a que el problema en este caso se convierte en un pozo de potencial finito, pero como ya sabemos este problema tiene una solución bastante conocida:

$$Z_i(z_i) = \frac{1}{\sqrt{N}} \begin{cases} \cos(k_{z_i} z_i) & |z_i| < \frac{L}{2} \\ \cos\left(k_{z_i} \frac{L}{2}\right) e^{-\kappa_{z_i} \left(|z_i| - \frac{L}{2}\right)} & |z_i| \geq \frac{L}{2} \end{cases} \quad (2.12)$$

donde la constante de normalización es:

$$N = \frac{L}{2} + \frac{\cos^2\left(k_{z_i} \frac{L}{2}\right)}{\kappa} + \frac{\sin(k_{z_i} L)}{2k_{z_i}} \quad (2.13)$$

y como ya sabemos los vectores de onda están definidos como:

$$k_{z_i} = \sqrt{E_{z_i}} \quad \kappa_{z_i} = \sqrt{E_{z_i} - V_{0i}(z_1)} \quad k_{\rho_i} = \sqrt{E_{\rho_i}} \quad (2.14)$$

## 2.3 MÉTODO DE DIMENSIÓN FRACTAL APLICADO AL EXCITÓN

El MDF aplicado a un excitón en una heteroestructura, consiste a grandes rasgos, en encontrar una solución variacional a la ecuación de Schrödinger para un sistema dado,

utilizando una función de onda en forma de producto de las funciones de onda del electrón y el hueco no correlacionados, es decir libres en el sistema por separado, con una función envolvente que describe la modificación de la probabilidad de distribución producida por la atracción coulombiana entre las dos partículas y su influencia en el sistema, esta función envolvente es calculada a través del principio variacional de Schrödinger, para así llegar a encontrar una ecuación diferencial de segundo orden, que se soluciona numéricamente utilizando el MBT, encontrándose al mismo tiempo la energía de enlace del sistema.

Utilizamos el Hamiltoniano descrito en la ecuación (2.5), pero en este trabajo solo analizaremos la solución para el excitón isotrópico ( $\eta_{\perp} = \eta_{\parallel}$ ) (ver mejoramiento del método para un excitón anisotrópico en el *Apéndice B*). Al solucionar la ecuación de Schrödinger para el excitón en el sistema utilizamos las funciones de onda para las partículas libres halladas anteriormente (2.10) y (2.12), y de esta forma encontramos que la función  $f_0$  utilizada en la ecuación (1.4), esta dada por:

$$f_0 = R_1(\rho_1)R_2(\rho_2)Z_1(z_1)Z_2(z_2) \quad (2.15)$$

donde los subíndices 1 y 2 indican electrón y hueco respectivamente.

Por último como ya vimos anteriormente, al minimizar el funcional de la función envolvente, obtenemos:

$$\Phi''(r) + \left( \frac{J(r)'}{J(r)} \right) \Phi'(r) + \left( \frac{2}{r} + E_b \right) \Phi(r) = 0 \quad (2.16)$$

Donde  $E_b$  es la energía de enlace del estado base del excitón y el Jacobiano del sistema  $J(r)$ , esta dado como (ver cálculo detallado del Jacobiano en el *Apéndice A*):

$$J(r) = 16\pi r^2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} [I(r \cos \theta) + I(-r \cos \theta)] \sin \theta d\theta \int_0^R R_1^2(\rho_1) \rho_1 d\rho_1 \int_0^1 \frac{F_{R+} + F_{R-}}{\sqrt{2-x^2}} dx \quad (2.17)$$

donde:

$$I(z) = \int_0^{\infty} Z_1^2 \left( w + \frac{z}{2} \right) Z_2^2 \left( w - \frac{z}{2} \right) dw \quad (2.18)$$

$$F_{R_{\pm}} = R_2^2 \left( \sqrt{\rho_1^2 + (r \sin \theta)^2} \pm 2\rho_1(x^2 - 1)r \sin \theta \right) \quad (2.19)$$

Para solucionar la ecuación (2.16) utilizamos el MBT.

## 2.4 MÉTODO DE BARRIDO TRIGONOMÉTRICO APLICADO AL EXCITÓN

Como se puede ver en la ecuación (2.17), el Jacobiano puede ser escrito de la forma:

$$J(r) = r^2 P(r) \quad (2.20)$$

Así que la ecuación (2.16) puede ser escrita de la forma:

$$\Phi''(r) + \left( \frac{2}{r} + (\ln P(r))' \right) \Phi'(r) + \left( \frac{2}{r} + E_b \right) \Phi(r) = 0 \quad (2.21)$$

es fácil notar que esta ecuación tiene la misma forma de la ecuación (1.11), por esto la ecuación (1.14) también es solución de este problema, pero para este caso, tenemos que:

$$\alpha(r) = \left( \frac{2}{r} + (\ln P(r))' \right) \quad (2.22)$$

$$\beta(r) = \left( \frac{2}{r} + E_b \right)$$

Al utilizar la transformación de coordenadas descrita en la ecuación (1.12) y reemplazarla en la ecuación (2.22) para la función  $\Phi(r)$ , obtenemos las condiciones iniciales del problema:

$$\theta(0) = -\frac{\pi}{4} \quad \theta(\infty) = -\frac{\pi}{2} \quad (2.23)$$

De esta forma, la solución de la ecuación (2.21), esta dada por la solución de la ecuación (1.14) con las condiciones iniciales (2.23), lo que se convierte en un problema de cauchy que como dijimos antes es fácilmente soluble.

---

# CÁLCULOS Y RESULTADOS

---

## 3.1 PARÁMETROS DEL MATERIAL

Los parámetros efectivos para el desarrollo de este trabajo fueron tomados de una publicación hecha por Greene y Bajaj [9], en la que se estudió el problema de un excitón en un QW de  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ , usando los parámetros dados en la tabla adjunta:

Con estos datos se calcularon los valores para el radio de Bohr efectivo y Rydberg efectivo, encontrándose  $a_{0_{hh}} = 16,48nm$ ,  $Ry_{0_{hh}} = 3,49meV$  para el excitón con hueco pesado ( $X_{hh}$ ) y  $a_{0_{lh}} = 13,07nm$ ,  $Ry_{0_{lh}} = 4,40meV$  para el excitón con hueco ligero ( $X_{lh}$ ).

<b>PARÁMETRO</b>	<b>SÍMBOLO</b>	<b>VALOR</b>
Constante dielectrica	$\epsilon$	12,5
Masa efectiva del electrón	$m_e$	$0,067m_0$
Masa efectiva del hueco pesado (hh)	$m_{hh}$	$0,45m_0$
Masa efectiva del hueco ligero (lh)	$m_{lh}$	$0,08m_0$
Brecha de energía	$E_g$	$379,8meV$
Porcentaje Banda de Conducción	$Q_c$	0,85
Porcentaje Banda de valencia	$Q_v$	0,15
Potencial para el electrón	$V_{0e}$	$322,83meV$
Potencial para el hueco	$V_{0h}$	$56,97meV$
Concentración de <i>Al</i>	$x$	0,30
Parámetros de Kohn-Luttinger	$\gamma_1$	7,36
	$\gamma_2$	2,57

Tabla 3.1: *Parámetros físicos utilizados en este trabajo*

### 3.2 Energía de enlace del excitón en el sistema

La energía de enlace para el estado base  $E_{b_0}$  del excitón ( $X$ ) en el sistema, está definida como la energía necesaria para que el electrón quede libre de la interacción con el hueco. En este trabajo se analiza la influencia de las dimensiones de la heteroestructura  $R$  y  $L$  sobre  $E_{b_0}$ .

### 3.2.1. Confiabilidad del Método (Casos Limites)

Primero es necesario indagar sobre la eficiencia del método utilizado y la confiabilidad de sus resultados, es por esto que comparamos nuestros resultados con otros obtenidos en trabajos anteriores sobre sistemas similares al nuestro, en algunos casos limites.

Sin embargo, debido a que en este trabajo sólo se hace una aproximación con un modelo simple isotrópico para la masa del hueco (debido a la complejidad del tratamiento matemático), es necesario aclarar que los resultados obtenidos en el presente capítulo sólo podrán ser comparados cualitativamente con resultados de trabajos previos en situaciones similares.

#### Caso 1: Pozo Cuántico (QW)

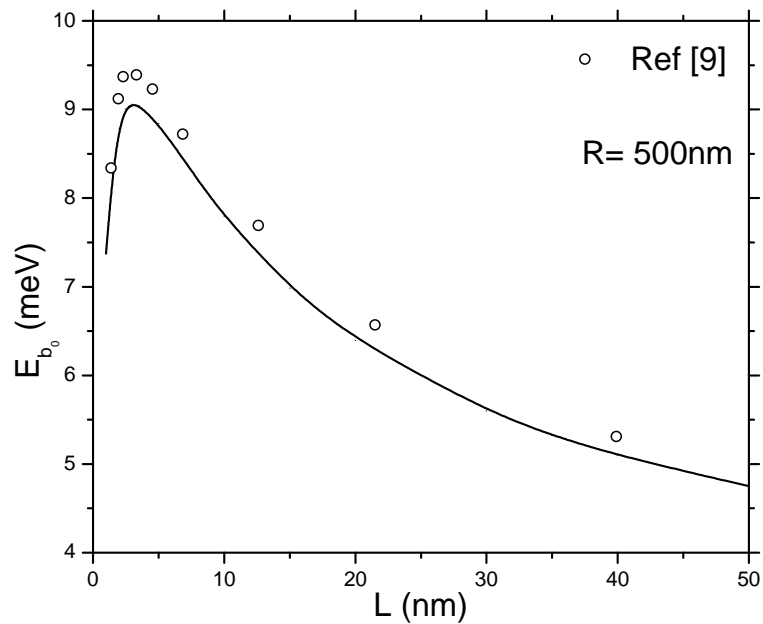


Figura 3.1: Energía de enlace de  $X_{hh}$  para el caso limite QW

Al tomar  $R \gg L$ , las partículas sienten muy tenuemente el confinamiento en dirección radial y el problema se convierte en un problema casi bidimensional es decir un QW, las curvas mostradas en las figuras 3.1 y 3.2 contienen resultados de los cálculos hechos para un excitón con hueco pesado ( $X_{hh}$ ) y hueco ligero ( $X_{lh}$ ) respectivamente.

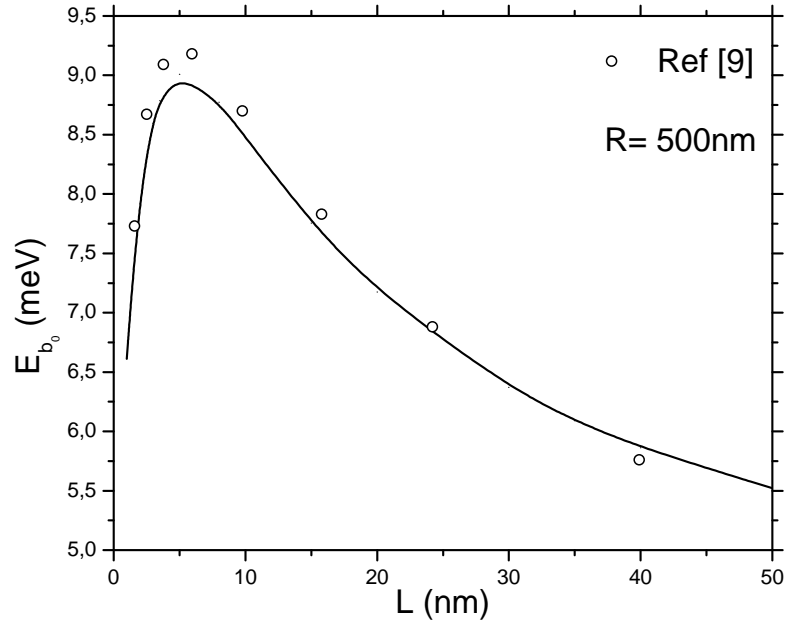


Figura 3.2: *Energía de enlace de  $X_{lh}$  para el caso límite QW*

Como se puede ver en dichas figuras, el comportamiento de  $E_{b_0}$  es muy similar al del artículo de referencia [9], pero el lector puede notar que existen algunas discrepancias, esto es debido a que a pesar del gran valor de  $R$  las partículas aun sienten algo del confinamiento radial infinito (es decir no están totalmente libres en dirección radial), además como ya hemos explicado, en este trabajo solo consideramos una aproximación isotrópica para el excitón mientras que en el artículo de referencia se analiza el problema para el excitón anisotrópico.

### Caso 2: Hilo Cuántico (QWW)

Al tomar  $L \gg R$ , el confinamiento en la dirección de crecimiento del sistema es muy débil y tiende a desaparecer, para este caso la estructura toma una forma similar a la de un QWW, para el cual se obtiene la curva mostrada en la figura 3.3.

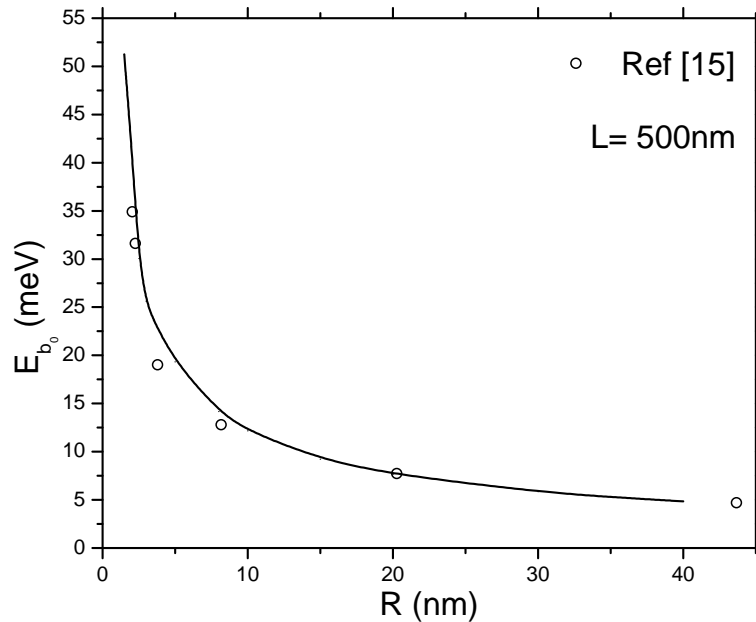


Figura 3.3: *Energía de enlace de  $X_{hh}$  para el caso límite QWW*

Como se puede ver en la figura 3.3, se calculó la energía de enlace para cuando las dimensiones son semejantes a las de un hilo cuántico, y se comparan los datos con un trabajo previo realizado sobre este tipo de estructuras, las comparaciones fueron hechas para el excitón con hueco pesado ( $X_{hh}$ ) encontrándose una gran proximidad entre ambos cálculos.

Es de resaltar que aunque, como ya dijimos, solo es posible hacer una comparación cualitativa con otros trabajos similares, en la figura 3.3 los resultados son muy cercanos

a los del artículo de referencia [15], esto es debido a que, tanto en este trabajo como en dicho artículo, se considera el potencial infinito en dirección radial, lo que hace que la influencia de la anisotropía del excitón no sea muy considerable.

### Caso 3: Disco Cuántico

Otra posibilidad es considerar el modelo un poco más general de un disco cuántico, en el cual las dimensiones  $R$  y  $L$  son comparables, para esto consideramos  $L$  constante (en este caso  $L = 7\text{nm}$ ) y variamos  $R$ , podemos comparar nuestros resultados con otros obtenidos en diversas publicaciones sobre estudios de sistemas similares.

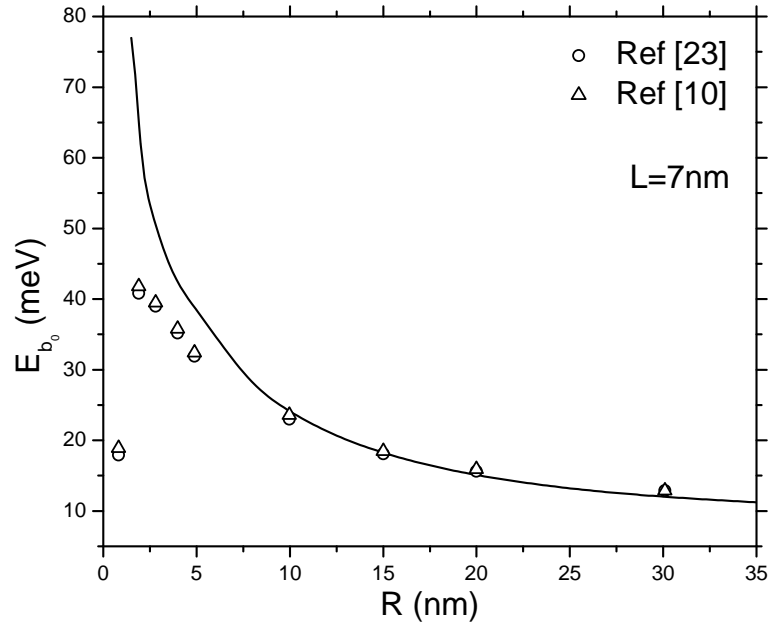


Figura 3.4: *Energía de enlace de  $X_{hh}$  para un Disco Cuántico, en este caso  $L=7\text{nm}$*

Es necesario aclarar que la aproximación que estamos haciendo es la de un disco cuántico con potencial radial infinito, en la figura 3.4 se comparan nuestros resultados con

trabajos anteriores [23, 10] en los que se calculó la energía de enlace para un disco cuántico con potencial radial finito.

En el caso de un disco cuántico finito, como en los artículos de referencia para la comparación [23, 10], al disminuir  $R$ , la energía de enlace alcanza un valor máximo cuando la función de onda se desborda, para cierto valor de  $R$ , esto es debido al potencial finito de la estructura por lo que es posible que el electrón tunele y de esta forma la energía de enlace de nuevo disminuya para valores mas pequeños de  $R$ .

Debido al potencial (2.1) del disco cuántico que se estudia en este trabajo, a medida que  $R$  disminuye,  $E_{b_0}$  aumenta pero como no existe la posibilidad de tunelamiento para el electrón (ya que el potencial es infinito en dirección radial), la función de onda no se desborda y por consiguiente la energía de enlace no deja de aumentar.

Sin embargo en la figura (3.4) se puede observar una concordancia casi total para cuando  $R$  no es tan pequeña ( $R > 10nm$ ), rango en el cual la comparación es posible a pesar de la diferencia del potencial de los discos, lo que de nuevo muestra la eficiencia de nuestro método.

Empero, aunque el objetivo de este trabajo es hacer un cálculo aproximado de  $E_{b_0}$  utilizando un modelo simple isotrópico, el MDF utilizado permite una solución completa al problema de la anisotropía del excitón, por ese motivo en este trabajo se plantea como proyecto a futuro el mejoramiento del método (ver *Apéndice B*).

Luego de haber mostrado la eficiencia del método utilizado y los limites de este trabajo, nos dedicaremos a analizar el comportamiento de  $E_{b_0}$  cuando las dimensiones del disco  $R$  y  $L$  varían, además de la influencia del doble confinamiento del sistema.

### 3.2.2. Energía de enlace ( $E_{b_0}$ ) Vs Altura del disco ( $L$ )

Al fijar constante un valor para  $R$  y variar  $L$ , se puede obtener como caso limite (cuando  $R \gg L$ ) una estructura similar a un QW.

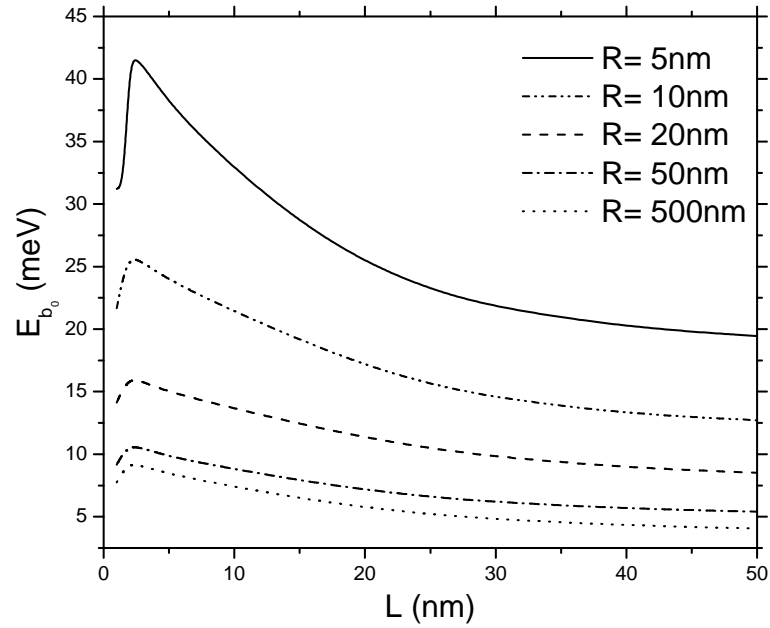


Figura 3.5: Energía de enlace de  $X_{hh}$  en un disco cuántico para distintos valores de  $R$

En las figuras (3.5) y (3.6) se observa que el comportamiento de  $E_{b_0}$  es similar para diferentes valores de  $R$ . Como se puede apreciar en las figuras el valor de  $E_{b_0}$  decrece con el aumento de  $R$ , esto se puede explicar debido al hecho que como el volumen del disco esta dado por  $V = 2\pi R^2 L$ , al aumentar  $R$  el volumen también aumenta y debido a esto las partículas sienten cada vez menos el confinamiento de la heteroestructura, por lo que la energía de enlace disminuye ya que al haber menor confinamiento se necesita menor energía para liberar al electrón de la interacción con el hueco.

Por otro lado se puede notar que  $E_{b_0}$  alcanza su máximo para un determinado valor critico de  $L$ , esto es debido a que a medida que  $L$  disminuye,  $E_{b_0}$  aumenta ya que el

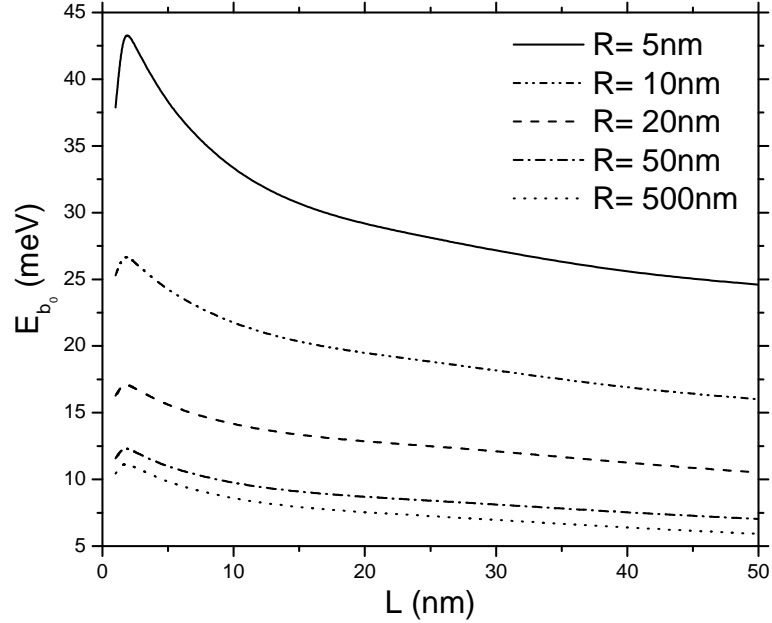


Figura 3.6: *Energía de enlace de  $X_{lh}$  en un disco cuántico para distintos valores de  $R$*

confinamiento de la partícula es mayor, pero cuando el confinamiento es muy fuerte la función de onda se desborda y por lo tanto el electrón puede tunelar lo que hace que  $E_{b_0}$  disminuya para valores de  $L$  menores que este valor crítico.

Además, también es fácil ver que para un  $R$  dado la curva de  $E_{b_0}$  para el excitón con hueco ligero  $X_{lh}$  es mas alta que para el excitón con hueco pesado  $X_{hh}$ , esto se debe a que para el  $X_{lh}$  la masa del hueco es menor que para el  $X_{hh}$ , y debido a que el aporte cinético a la energía del hueco es inversamente proporcional a su masa, entre menor sea la masa mayor será  $E_{b_0}$ .

### 3.2.3. Energía de enlace ( $E_{b_0}$ ) Vs Radio del disco ( $R$ )

De igual forma también es posible fijar un valor para  $L$  y variar  $R$ , obteniendo como caso limite (cuando  $L \gg R$ ) un sistema similar a un QWW.

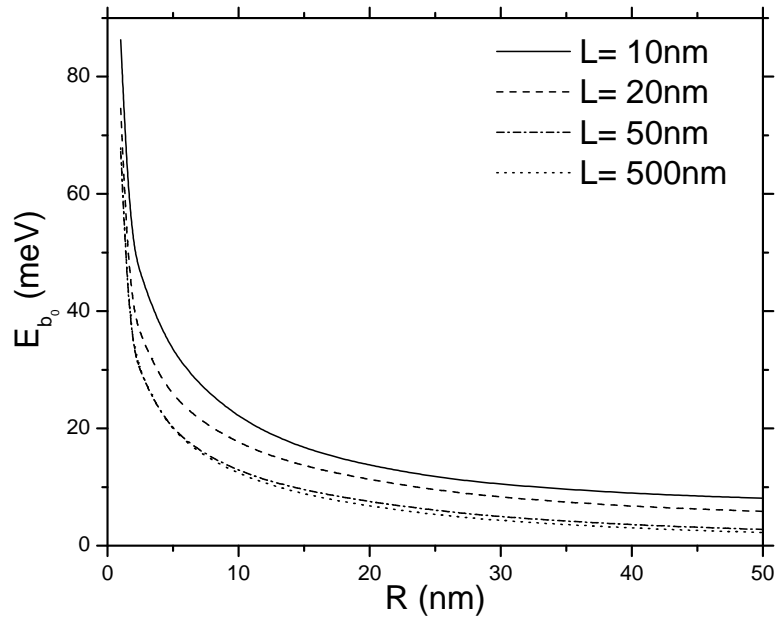


Figura 3.7: Energía de enlace de  $X_{hh}$  en un disco cuántico para distintos valores de  $L$

Para este caso, como se puede observar tanto en la figura (3.7) como en la (3.8), la energía de enlace aumenta a medida que disminuye  $R$ , pero al contrario del caso anterior no existe un valor máximo para la energía de enlace.

Este hecho se explica debido a que el confinamiento en dirección radial es infinito, por esto a pesar de que el volumen del disco disminuye y el confinamiento de las partículas es mas fuerte, no es posible que se presente el efecto túnel para el electrón ya que la función de onda radial nunca se desborda y por consiguiente la energía de enlace seguirá aumentando mientras el radio disminuya.

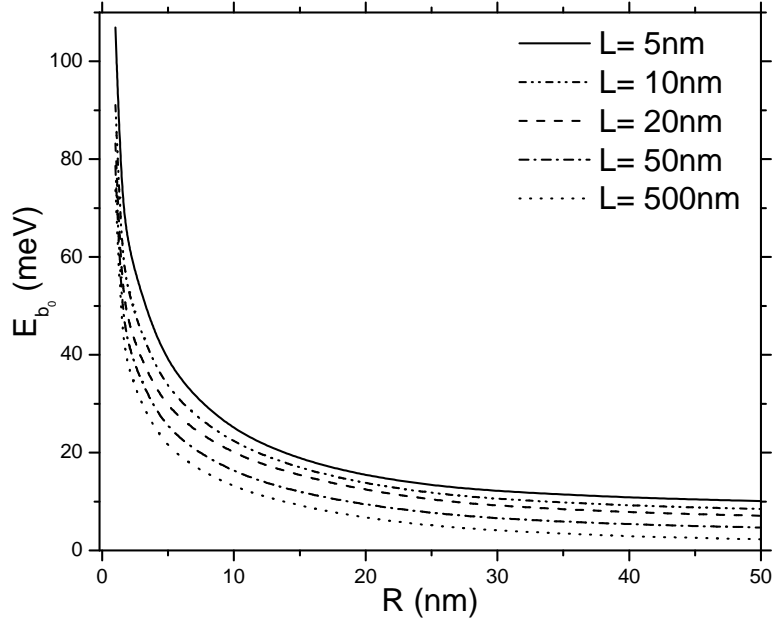


Figura 3.8: *Energía de enlace de  $X_{lh}$  en un disco cuántico para distintos valores de  $L$*

Aunque también es posible explicar este comportamiento haciendo uso del principio de incertidumbre de Heisenberg, ya que el confinamiento radial es infinito, al fijar un valor para  $L$  y disminuir  $R$  lo que en realidad está ocurriendo es que se está localizando la partícula sobre el eje del hilo y por el principio de incertidumbre sabemos que al aumentar la precisión sobre la posición de la partícula disminuye la precisión sobre el momento lineal de la misma, debido a que la contribución cinética a la energía de la partícula es proporcional al cuadrado de su momento lineal mientras más se localice la partícula mayor será su energía.

También es importante notar la influencia de la diferencia del confinamiento en ambas direcciones del disco sobre la energía de enlace, ya que se puede ver que como era de esperarse, el aumento del confinamiento aumenta el valor de la energía de enlace del estado base del excitón en el sistema.

# CONCLUSIONES

---

Se presentó un método simple y sencillo para calcular la energía de enlace del estado base de un excitón, tanto con hueco pesado como con hueco ligero, en un disco cuántico embebido en un hilo cuántico de  $GaAs/Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ . Se realizó detalladamente el procedimiento seguido para estos cálculos utilizando el Método de Dimension Fractal aplicado a un modelo isotrópico para el excitón.

Se mostró la eficiencia y la confiabilidad del método utilizado para el cálculo de la energía de enlace del estado base, al comparar los resultados obtenidos con resultados de trabajos previos en los casos límites QW, QWW y Disco Cuántico infinito, obteniendo resultados muy similares.

Se presentaron las curvas de la energía de enlace del estado base para un excitón en el sistema, utilizando diferentes dimensiones para el disco embebido. Con esto se demostró que la energía de enlace del estado base depende fuertemente de las dimensiones del disco y del confinamiento de la heteroestructura, encontrándose que la influencia de las dimensiones sobre la energía de enlace esta directamente relacionada con el volumen de la estructura de tal forma que a medida que el volumen aumenta la energía de enlace disminuye de manera considerable; mientras que el efecto del confinamiento sobre la energía de enlace esta dada en que a medida que el confinamiento aumenta la energía de enlace también lo hace, es así como cuando el confinamiento es infinito

---

(como en el caso radial de este trabajo), el principio de incertidumbre permite que la energía de enlace del estado base no alcance un valor máximo para ningún valor de  $R$ , por pequeño que este sea.

Como trabajo a futuro se plantea el mejoramiento del método para el cálculo de la energía de enlace del estado base, incluyendo la influencia de la anisotropía de la masa del hueco y su corrección sobre el cálculo del Jacobiano del sistema, lo que hará al método mucho más eficiente y le dará más exactitud al cálculo de la energía de enlace.

# APÉNDICES

---

## A. CÁLCULO DEL JACOBIANO DEL SISTEMA

Partiendo de la definición del Jacobiano de la ecuación (1.7), encontramos, debido a que la función de onda axial (2.12) es simétrica, que:

$$J(r) = 4 \int_0^{\infty} R_1^2(\rho_1) \rho_1 d\rho_1 \int_0^{\infty} R_2^2(\rho_2) \rho_2 d\rho_2 \int_0^{\infty} Z_1^2(z_1) dz_1 \int_0^{\infty} Z_2^2(z_2) dz_2 * \\ * \int_0^{2\pi} d\varphi_1 \int_0^{2\pi} \delta(r - \sqrt{\rho_1^2 + \rho_2^2 - 2\rho_1\rho_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2) + (z_1 - z_2)^2}) d\varphi_2 \quad (1)$$

Luego de hacer el siguiente cambio de variable:

$$\nu = \frac{\varphi_1 + \varphi_2}{2} \quad \varphi = \varphi_1 - \varphi_2 \quad (2)$$

y aplicar la siguiente propiedad de la función delta de Dirac.

$$\int \delta(f(\varphi) - r) d\varphi = \frac{1}{|f'(\varphi_0)|} \Big|_{f(\varphi_0)=r} \quad (3)$$

Se encuentra que:

$$\begin{aligned}
 J(r) &= 16\pi r \int_0^\infty R_1^2(\rho_1)\rho_1 d\rho_1 \int_0^\infty R_2^2(\rho_2)\rho_2 d\rho_2 \int_0^\infty Z_1^2(z_1) dz_1 * \\
 &* \int_0^\infty \frac{Z_2^2(z_2) dz_2}{\sqrt{4\rho_1^2\rho_2^2 - (\rho_1^2 + \rho_2^2 - r^2 + (z_1 - z_2)^2)^2}} \Theta \left[ 1 - \left| \frac{\rho_1^2 + \rho_2^2 - r^2 + (z_1 - z_2)^2}{2\rho_1\rho_2} \right| \right]
 \end{aligned} \tag{4}$$

donde  $\Theta$  es la bien conocida función de Heavyside.

Pero podemos notar que en estos momentos existe una singularidad en el denominador de la última integral que de todas formas no causa problema en la ecuación debido a la función de Heavyside. Sin embargo, es mejor evitar problemas, y por esto haremos un tratamiento matemático formal, para evitar este tipo de singularidades y problemas en la ecuación, debido a la necesidad de solucionar numéricamente con ayudas computacionales este Jacobiano.

Es así como de nuevo hacemos un cambio de variable:

$$w = \frac{z_1 + z_2}{2} \quad z = z_1 - z_2 \tag{5}$$

y el Jacobiano toma la forma:

$$\begin{aligned}
 J(r) &= 16\pi r \int_0^\infty R_1^2(\rho_1)\rho_1 d\rho_1 \int_0^\infty R_2^2(\rho_2)\rho_2 d\rho_2 * \\
 &* \int_{-\infty}^\infty \frac{I(z) dz}{\sqrt{4\rho_1^2\rho_2^2 - (\rho_1^2 + \rho_2^2 - (r^2 - z^2))^2}} \Theta \left[ 1 - \left| \frac{\rho_1^2 + \rho_2^2 - (r^2 - z^2)}{2\rho_1\rho_2} \right| \right]
 \end{aligned} \tag{6}$$

donde:

$$I(z) = \int_0^\infty Z_1^2 \left( w + \frac{z}{2} \right) Z_2^2 \left( w - \frac{z}{2} \right) dw \tag{7}$$

Luego de hacer el siguiente reemplazo:

$$y = \sqrt{r^2 - z^2} \quad (8)$$

encontramos que:

$$J(r) = 16\pi r \int_{-r}^r \frac{[I(\sqrt{r^2 - y^2}) + I(-\sqrt{r^2 - y^2})]}{\sqrt{r^2 - y^2}} G(y) y dy \quad (9)$$

donde:

$$G(y) = \int_0^\infty R_1^2(\rho_1) \rho_1 d\rho_1 \int_0^\infty \frac{R_2^2(\rho_2) \rho_2 d\rho_2}{\sqrt{4\rho_1^2 \rho_2^2 - (\rho_1^2 + \rho_2^2 - y^2)^2}} \Theta \left[ 1 - \left| \frac{\rho_1^2 + \rho_2^2 - y^2}{2\rho_1 \rho_2} \right| \right] \quad (10)$$

Sin embargo, la ecuación (9) tiene una singularidad en los límites de la integral, pero este inconveniente es fácilmente soluble haciendo el cambio de variable  $y = r \sin \theta$ , y de esta forma se obtiene que la ecuación (9) se transforma en:

$$J(r) = 16\pi r^2 \int_0^{\pi/2} [I(r \cos \theta) + I(-r \cos \theta)] \sin(\theta) G(r \sin \theta) d\theta \quad (11)$$

En el denominador de la ecuación (10) se puede ver y fácilmente demostrar que las variables  $\rho_1$ ,  $\rho_2$  y  $y$  son conmutables, utilizando este hecho y evaluando la condición impuesta por la función de Heavyside, la ecuación (10) se convierte en:

$$G(y) = \int_0^\infty R_1^2(\rho_1) \rho_1 d\rho_1 \int_{|\rho_1 - y|}^{\rho_1 + y} \frac{R_2^2(\rho_2) \rho_2 d\rho_2}{\sqrt{4\rho_1^2 y^2 - (\rho_1^2 + y^2 - \rho_2^2)^2}} \quad (12)$$

A pesar de los pasos seguidos anteriormente, podemos notar que la ecuación (12) tiene un par de singularidades en los límites de la última integral, así que analizaremos ahora esta última integral por separado, la llamaremos  $Q(\rho_1)$  y la partiremos en dos integrales de la siguiente forma:

$$Q_1(\rho_1) = \int_{|\rho_1 - y|}^{\sqrt{\rho_1^2 + y^2}} \frac{R_2^2(\rho_2) \rho_2 d\rho_2}{\sqrt{4\rho_1^2 y^2 - (\rho_1^2 + y^2 - \rho_2^2)^2}}$$

$$Q_2(\rho_1) = \int_{\sqrt{\rho_1^2+y^2}}^{\rho_1+y} \frac{R_2^2(\rho_2)\rho_2 d\rho_2}{\sqrt{4\rho_1^2 y^2 - (\rho_1^2 + y^2 - \rho_2^2)^2}}$$

Para resolver la integral de la función  $Q_1(\rho_1)$  hacemos el reemplazo:

$$\rho_2^2 - (\rho_1 - y)^2 = 2\rho_1 y z \quad (13)$$

De la misma forma, para resolver la función  $Q_2(\rho_1)$  hacemos el reemplazo:

$$\rho_2^2 - (\rho_1 + y)^2 = -2\rho_1 y z \quad (14)$$

Así pues, encontramos que la función  $Q(\rho_1)$ , ahora se convierte en:

$$Q(\rho_1) = \int_0^1 \frac{R_2^2(\sqrt{\rho_1^2 + y^2 + 2\rho_1 y(z-1)}) + R_2^2(\sqrt{\rho_1^2 + y^2 + 2\rho_1 y(1-z)})}{2\sqrt{z(2-z)}} dz \quad (15)$$

en esta ecuación podemos ver que aún persiste la singularidad, aunque ahora solo para cuando  $z = 0$ , sin embargo esta singularidad es evitable, para esto hacemos el cambio de variable  $z = x^2$  y obtenemos:

$$Q(\rho_1) = \int_0^1 \frac{R_2^2(\sqrt{\rho_1^2 + y^2 + 2\rho_1 y(x^2-1)}) + R_2^2(\sqrt{\rho_1^2 + y^2 + 2\rho_1 y(1-x^2)})}{\sqrt{2-x^2}} dx \quad (16)$$

donde podemos ver que la singularidad ha desaparecido por completo y por lo tanto no hay ningún problema al desarrollar esta integral. Así que la ecuación (12) se convierte en:

$$G(y) = \int_0^\infty R_1^2 \rho_1 d\rho_1 \int_0^1 \frac{F_{R+} + F_{R-}}{\sqrt{2-x^2}} dx \quad (17)$$

donde:

$$F_{R\pm} = R_2^2 \left( \sqrt{\rho_1^2 + y^2 \pm 2\rho_1 y(x^2-1)} \right) \quad (18)$$

Ahora, resumiendo los cálculos y reorganizando todo de nuevo, encontramos que el Jacobiano esta dado por:

$$J(r) = 16\pi r^2 \int_0^{\pi/2} [I(r\cos(\theta)) + I(-r\cos(\theta))] \sin(\theta) G(r\sin(\theta)) d\theta \quad (19)$$

Aquí podemos ver claramente, que ya no existe ningún problema de singularidad ni comportamientos extraños en las integrales del Jacobiano.

## B. MEJORAMIENTO DEL MÉTODO

En este trabajo se utilizó el método de dimensión fractal para el cálculo de la energía de enlace del estado base de un excitón en un disco cuántico embebido en un hilo cuántico, sin embargo como ya se comentó antes, sólo se analizó un modelo simple isotrópico para el excitón.

En esta sección, se muestra la corrección de los cálculos para la solución al modelo real anisotrópico del excitón en el sistema.

Debido a la anisotropía de la masa del hueco:

$$\eta_{\perp} + \eta_e \neq \eta_{\parallel} + \eta_e \quad (20)$$

al minimizar el funcional de la ecuación (1.6), la ecuación diferencial que se obtiene es:

$$\frac{1}{\mathbf{J}_0(\mathbf{r})} \frac{d}{dr} \left( \mathbf{J}_1(\mathbf{r}) \frac{d\Phi(r)}{dr} \right) + \frac{2}{r} \Phi(r) = -E_b \Phi(r) \quad (21)$$

donde se puede notar que ésta es la corrección de la ecuación (1.8).

Además, como se puede ver ahora existen dos Jacobianos, que a partir de la definición en la ecuación (1.7) y con las correcciones por la anisotropía de la masa del hueco, están dados de la forma:

$$\mathbf{J}_0(\mathbf{r}) = \int_{r_e} \int_{r_h} f_{0_e}^2 f_{0_h}^2 \delta(r - |\vec{r}_e - \vec{r}_h|) d\vec{r}_h d\vec{r}_e \quad (22a)$$

$$\mathbf{J}_1(\mathbf{r}) = \int_{r_e} \int_{r_h} f_{0_e}^2 f_{0_h}^2 \frac{(\eta_{\perp} + \eta_e) (z_e - z_h)^2 + (\eta_{\parallel} + \eta_e) \rho_{eh}^2}{r^2} \delta(r - |\vec{r}_e - \vec{r}_h|) d\vec{r}_h d\vec{r}_e \quad (22b)$$

Y la ecuación (2.16) se convierte en:

$$\Phi''(r) + \left( \frac{\mathbf{J}_1(\mathbf{r})'}{\mathbf{J}_1(\mathbf{r})} \right) \Phi'(r) + \left( \frac{2}{r} + E_b \right) \frac{\mathbf{J}_0(\mathbf{r})}{\mathbf{J}_1(\mathbf{r})} \Phi(r) = 0 \quad (23)$$

Por último se puede ver, que esta ecuación es soluble utilizando el Método de Barrido Trigonométrico (MBT), antes explicado.

# REFERENCIAS

---

- [1] J. H. Davis, *The physics of low dimensional semiconductors an introduction*, Cambridge University Press. 1998, p. 80
- [2] W. Hornischer, P. Grambow, T. Demel, E. Bauser, C. Heitmann, K. Von Klitzing and K. Ploog, *Appl. Phys. Lett.* **60** 2998 (1998)
- [3] R. C. Miller, D. A. Kleinman, W. T. Tsang and A. C. Gossard, *Phys. Rev. B* **24** 1134 (1981)
- [4] A. Matos-Abiague, L. E. Oliveira and M. de Dios-Leiva, *Phys. Rev. B* **58** 4072 (1998)
- [5] A. V. Filinov, C. Riva, F. M. Peeters, Y. E. Lozovik and M. Bonitz, *Phys. Rev. B* **70** 035323 (2004)
- [6] J. L. Zhu, D. H. Tang and J. J. Xiong, *Phys. Rev. B* **39** 8609 (1989)
- [7] R. A. Escorcia, J. Sierra-Ortega, I. D. Mikhailov and F. J. Betancur, *Physica B* **355** 255-263 (2005)
- [8] G. Bastard, E. E. Mendez, L. L. Chang and L. Esaki, *Phys. Rev. B* **26** 1974 (1982)
- [9] R. L. Greene, K. K. Bajaj and D. E. Phelps, *Phys. Rev. B* **29** 1807 (1984)

- 
- [10] S. Le Goff and B. Stébé, Phys. Rev. B **47** 1383 (1993)
- [11] R. A. Escorcia, R. Robayo and I. D. Mikhailov, Phys. Stat. Sol. (b) **230** 431-436 (2002)
- [12] M. H. Degani and O. Hipólito, Phys. Rev. B **35** 9345 (1987)
- [13] A. Balandin and S. Bandyopadhyay, Phys. Rev. B **52** 8312 (1995)
- [14] E. Kasapoglu, H. Sari, M. Bursal and I. Sökmen, Physica E **16** 237-243 (2003)
- [15] J. W. Brown and H. N. Spector, Phys. Rev. B **35** 3009 (1987)
- [16] Gang Li, S. V. Branis and K. K. Bajaj, J. Appl. Phys. **77** 1907 (1995)
- [17] Y. Sidor, B. Partoens and F. M. Peeters, Phys. Rev. B **71** 165323 (2005)
- [18] M. S. Gudiksen, J. L. Lauhon, J. Wang, D. C. Smith and C. M. Lieber, Nature **415** 617-620 (2002)
- [19] J. Ristic, E. Calleja, M. A. Sánchez-García, J. M. Ulloa, J. Sánchez-Páramo, J. M. Calleja, U. Jahn, A. Trampert and K. H. Ploog, Phys. Rev. B **68** 125305 (2003)
- [20] L. C. Lew Yan Voon and M. Willatzen, J. Appl Phys. **93** 9997 (2003)
- [21] L. Esaki, R. Tsu, IBM J. Res. Dev. **14** 21 (1970)
- [22] D. Gershoni, M. Katz, W. Wegscheider, L. F. Pfeiffer, R. A. Logan and K. West, Phys. Rev. B **50** 8930 (1994)
- [23] T. S. Koh, Y. P. Feng, X. Xu and H. N. Spector, J. Phys.: Condens, Matter **13** 1485-1496 (2001)
- [24] P. Harrison, *Quantum Well, Wires and Dots*, Wiley Interscience, England, Ed. 2 (2005)

- 
- [25] B. B. Mandelbrot, *The Fractal geometric of nature*, W. H. Freeman, New York, (1983)
- [26] G. Arfken, *Mathematical methods for physicists*, Academic Press, Inc. Ed. 3. California (1985)
- [27] F. T. Vasko and A. V. Kutnetsov, *Electronic states and optical transition in semiconductor heterostructures*, Springer-Verlag, New York
- [28] A. S. Camacho Beltrán, *Impurezas y excitones en heteroestructuras semiconductoras II-VI*, Fundación para la promoción de la investigación y la tecnología, Bogotá.